Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

Н. Б. Мельников, Б. И. Резер, Поперечная восприимчивость и закон $T^{3/2}$ в динамической теории спиновых флуктуаций, *ТМФ*, 2014, том 181, номер 2, 358–373

DOI: <https://doi.org/10.4213/tmf8718>

Использование Общероссийского математического портала Math-Net.Ru подразумевает, что вы прочитали и согласны с пользовательским соглашением <http://www.mathnet.ru/rus/agreement>

Параметры загрузки:

IP: 3.80.181.102

26 апреля 2023 г., 13:36:26

© 2014 г.

Н. Б. Мельников*, Б. И. Резер†

ПОПЕРЕЧНАЯ ВОСПРИИМЧИВОСТЬ И ЗАКОН $T^{3/2}$ В ДИНАМИЧЕСКОЙ ТЕОРИИ СПИНОВЫХ ФЛУКТУАЦИЙ

Получены явные выражения для элементов тензора магнитной восприимчивости в динамической теории спиновых флуктуаций. С помощью аналитического продолжения функций Грина показано, что поперечная восприимчивость при низких температурах имеет спинволновые полюсы, которые дают асимптотический закон $T^{3/2}$ для намагнитченности. Явное выражение для коэффициента в законе $T^{3/2}$ выведено на основе многополосного гамильтониана Хаббарда и реальной зонной структуры. Правильное низкотемпературное поведение намагнитченности продемонстрировано на примере железа.

Ключевые слова: спиновые флуктуации, динамическая восприимчивость, намагнитченность, закон $T^{3/2}$, низкие температуры.

DOI: 10.4213/tmf8718

1. ВВЕДЕНИЕ

Квантово-статистическое вычисление тензора магнитной восприимчивости, зависящего от волнового вектора и частот, важно для теоретического объяснения магнитных свойств металлов (см., например, [1], [2]). В приближении случайных фаз для однополосного гамильтониана Хаббарда поперечная восприимчивость $\chi_{\mathbf{q}}^{-+}(\omega)$ дается выражением [3]

$$\chi_{\mathbf{q}}^{-+}(\omega) = \frac{\chi_{\mathbf{q}}^{0-+}(\omega)}{1 - I\chi_{\mathbf{q}}^{0-+}(\omega)}, \quad (1)$$

где $\chi_{\mathbf{q}}^{0-+}(\omega)$ — восприимчивость невзаимодействующих электронов, I — константа электронного взаимодействия. Как и в теории среднего поля Стонера, полная восприимчивость $\chi_{\mathbf{q}}^{-+}(\omega)$ связана с нулевой восприимчивостью $\chi_{\mathbf{q}}^{0-+}(\omega)$ фактором усиления $1 - I\chi_{\mathbf{q}}^{0-+}(\omega)$. Поперечная восприимчивость (1) имеет два типа особенностей,

---

*Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова, Москва, Россия.
E-mail: melnikov@cs.msu.su

†Институт физики металлов УрО РАН, Екатеринбург, Россия. E-mail: reser@imp.uran.ru

которые определяют различные магнитные возбуждения. Линии разреза определяют высокоэнергетические стонеровские возбуждения (переворот спина), а полюсы определяют низкоэнергетический спектр спиновых волн. Однако приближение случайных фаз дает хорошее согласие с экспериментом только при низких температурах, поскольку оно пренебрегает обратным влиянием спиновых волн на тепловое равновесное состояние.

Теория спиновых флуктуаций (ТСФ) [4]–[6] позволяет вычислять намагниченность переходных металлов и сплавов при всех температурах без преобразования гамильтониана системы коллективизированных электронов к эффективному гамильтониану с классическими спинами (см., например, [7]). В ТСФ используется метод функционального интегрирования [8], [9], который заменяет внутриатомное кулоновское отталкивание на взаимодействие электронов с флуктуирующим полем. Плотность вероятности флуктуирующего поля вычисляется самосогласованно и не содержит подгоночных параметров. Однако при *низких* температурах ни одно из приближений ТСФ не дает точного согласия с экспериментальными данными. Статическое приближение [4], [5] дает слишком быстрое убывание намагниченности, $m(T) \propto T$, а динамическое приближение [6] – слишком медленное убывание, $m(T) \propto T^2$. Причины этого расхождения с экспериментом различны [10]. Статическая ТСФ не учитывает квантовый характер спиновых флуктуаций. В динамической теории спиновых флуктуаций (ДТСФ) закон T^2 является результатом диагонального приближения тензора динамической восприимчивости [6].

В настоящей работе нами развито недиагональное приближение тензора восприимчивости в ДТСФ и использован метод аналитического продолжения (см., например, [11], [12]), чтобы показать, что поперечная восприимчивость имеет спинволновые полюсы при низких температурах. Нами выведен асимптотический закон $T^{3/2}$ для намагниченности в ферромагнитных металлах, который аналогичен закону $T^{3/2}$ Блоха [13] в диэлектриках¹⁾. В отличие от традиционного подхода (см., например, [1]), где спиновые волны рассматриваются как квазичастицы бозевского типа, понижающие спин на единицу, вывод закона $T^{3/2}$ в ДТСФ основан на вычислении локальной флуктуации поля в методе функционального интегрирования. Заметим, что при конечных температурах в различных приближениях теории ферромагнетизма (см., например, [15], [16]), помимо члена $T^{3/2}$, возникают и другие члены с дробными показателями, например $T^{4/3}$, $T^{5/2}$ и $T^{7/2}$. Однако эксперимент по намагниченности в железе при конечных температурах [17] в полном соответствии с ДТСФ дает член T^2 . Члены с дробными показателями в случае железа идентифицировать не удастся (см. ниже раздел 4). Аналогичная ситуация имеет место и для инварного сплава $\text{Fe}_{0.65}\text{Ni}_{0.35}$ [6].

Статья построена следующим образом. В разделе 2 мы развиваем недиагональное приближение для тензора восприимчивости, связываем магнитную восприимчивость в реальном времени с восприимчивостью в методе функционального интегрирования и получаем формулу для поперечной восприимчивости в оптимальном

¹⁾Для слабых ферромагнетиков вклад в намагниченность, пропорциональный $T^{3/2}$, был получен в рамках различных обобщений приближения случайных фаз (см., например, [14], [15]). Однако явное выражение для этого вклада в работах [14], [15] отсутствует.

гауссовом приближении ДТСФ [18], [19]. В разделе 3 мы выводим низкотемпературное выражение для поперечной восприимчивости и получаем явную формулу для коэффициента в законе $T^{3/2}$. В разделе 4 правильное низкотемпературное поведение намагниченности продемонстрировано на примере железа. Наконец, в разделе 5 суммированы результаты настоящей работы.

2. ПОПЕРЕЧНАЯ ДИНАМИЧЕСКАЯ ВОСПРИИМЧИВОСТЬ

В теории линейного отклика поперечная динамическая восприимчивость $\chi_{\mathbf{q}}^{-+}(\omega)$, выраженная в единицах $(g\mu_B)^2/2$ (g – электронный g -фактор, μ_B – магнетон Бора), задается формулой (см., например, [1])

$$\chi_{\mathbf{q}}^{-+}(\omega) = \lim_{\eta \rightarrow 0^+} 2i \int_0^\infty \langle [s_{\mathbf{q}}^-(t), s_{-\mathbf{q}}^+] \rangle e^{i\omega t - \eta t} dt. \quad (2)$$

Поясним использованные выше обозначения. Оператор спиновой плотности определяется соотношением

$$\mathbf{s}(\mathbf{r}) = \Psi^\dagger(\mathbf{r}) \left(\frac{1}{2} \boldsymbol{\sigma} \right) \Psi(\mathbf{r}),$$

где $\Psi^\dagger(\mathbf{r})$ и $\Psi(\mathbf{r})$ – спинорные полевые операторы, а $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma^x, \sigma^y, \sigma^z)$ – вектор матриц Паули. Спиновый оператор на узле решетки $\mathbf{R}_j$ задается выражением

$$\mathbf{s}_j = \int_{\Omega_j} \mathbf{s}(\mathbf{r}) d\mathbf{r},$$

где Ω_j – ячейка Вигнера–Зейтца, центрированная в $\mathbf{R}_j$. Пространственный фурье-образ оператора $s^\pm = (s^x \pm is^y)/2$ определяется по формуле

$$s_{\mathbf{q}}^\pm = \sum_j s_j^\pm e^{-i\mathbf{q}\mathbf{R}_j},$$

а зависимость от времени отвечает представлению Гейзенберга:

$$s_{\mathbf{q}}^-(t) = e^{iHt} s_{\mathbf{q}}^- e^{-iHt},$$

где H – гамильтониан системы. Угловые скобки означают каноническое среднее: $\langle \cdot \rangle = Z^{-1} \text{Tr}(\cdot e^{-H/T})$, где $Z = \text{Tr} e^{-H/T}$ – статистическая сумма, T – температура (в энергетических единицах); квадратные скобки обозначают коммутатор. В аргументе восприимчивости ω означает $\omega + i0$.

Восприимчивость $\chi_{\mathbf{q}}^{-+}(\omega)$ равна фурье-образу *запаздывающей* функции Грина бозонного типа²⁾

$$\frac{1}{2} \chi_{\mathbf{q}}^{-+}(t) = i \langle [s_{\mathbf{q}}^-(t), s_{-\mathbf{q}}^+] \rangle \theta(t), \quad (3)$$

²⁾ Коэффициент $1/2$ перед восприимчивостью возникает вследствие принятых нами единиц измерения $(g\mu_B)^2/2$. Как и в [1], для функции Грина бозонного типа мы используем противоположный знак по сравнению с функцией Грина фермионного типа.

где $\theta(t) = 0$ при $t < 0$ и $\theta(t) = 1$ при $t > 0$. В расчетах удобнее использовать температурную функцию Грина бозонного типа

$$\frac{1}{2}\chi_{\mathbf{q}}^{-+}(\tau, \tau') = \langle T_{\tau} s_{\mathbf{q}}^{-}(\tau) s_{-\mathbf{q}}^{+}(\tau') \rangle = \begin{cases} \langle s_{\mathbf{q}}^{-}(\tau) s_{-\mathbf{q}}^{+}(\tau') \rangle, & \tau > \tau', \\ \langle s_{-\mathbf{q}}^{+}(\tau') s_{\mathbf{q}}^{-}(\tau) \rangle, & \tau' > \tau, \end{cases} \quad (4)$$

где $s_{\mathbf{q}}^{-}(\tau) = e^{\tau H} s_{\mathbf{q}}^{-} e^{-\tau H}$ – “гейзенберговское” представление относительно “времени” $\tau \in [0, 1/T]$, а T_{τ} – оператор упорядочения по “времени”. В силу циклического свойства следа в формуле (4) температурная функция Грина зависит лишь от разности “времен”:

$$\chi_{\mathbf{q}}^{-+}(\tau, \tau') = \chi_{\mathbf{q}}^{-+}(\tau - \tau'). \quad (5)$$

Более того, имеет место следующее соотношение: $\chi_{\mathbf{q}}^{-+}(\tau - 1/T) = -\chi_{\mathbf{q}}^{-+}(\tau)$ при $\tau \in [0, 1/T]$. Поэтому коэффициенты Фурье отличны от нуля лишь для четных термодинамических “частот” $\omega_m = 2\pi mT$ и даются выражениями

$$\chi_{\mathbf{q}}^{-+}(i\omega_m) = \int_0^{1/T} \chi_{\mathbf{q}}^{-+}(\tau) e^{i\omega_m \tau} d\tau. \quad (6)$$

Вычисляя спиновый коррелятор в импульсно-“частотном” представлении:

$$\langle s_{\mathbf{q}m}^{-} s_{-\mathbf{q}-m}^{+} \rangle = T \int_0^{1/T} \langle s_{\mathbf{q}}^{-}(\tau) s_{-\mathbf{q}}^{+} \rangle e^{i\omega_m \tau} d\tau, \quad (7)$$

где

$$s_{\mathbf{q}m}^{\pm} = T \int_0^{1/T} s_{\mathbf{q}}^{\pm}(\tau) e^{i\omega_m \tau} d\tau,$$

записываем (6) в виде

$$\chi_{\mathbf{q}}^{-+}(i\omega_m) = \frac{2}{T} \langle s_{\mathbf{q}m}^{-} s_{-\mathbf{q}-m}^{+} \rangle. \quad (8)$$

Теперь установим соотношение между функциями $\chi_{\mathbf{q}}^{-+}(\omega)$ и $\chi_{\mathbf{q}}^{-+}(i\omega_m)$, используя метод аналитического продолжения (см., например, [11], [12]). Сначала выведем выражение для $\chi_{\mathbf{q}}^{-+}(\omega)$ в базисе собственных векторов гамильтониана H . Используя (3), имеем

$$\begin{aligned} \chi_{\mathbf{q}}^{-+}(t) = & \frac{2i}{Z} \left(\sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} e^{i\varepsilon_{\mathbf{k}} t} (s_{\mathbf{q}}^{-})_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} e^{-i\varepsilon_{\mathbf{k}'} t} (s_{-\mathbf{q}}^{+})_{\mathbf{k}', \mathbf{k}} e^{-\varepsilon_{\mathbf{k}}/T} - \right. \\ & \left. - \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} (s_{-\mathbf{q}}^{+})_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} e^{i\varepsilon_{\mathbf{k}'} t} (s_{\mathbf{q}}^{-})_{\mathbf{k}', \mathbf{k}} e^{-i\varepsilon_{\mathbf{k}} t} e^{-\varepsilon_{\mathbf{k}}/T} \right) \theta(t), \end{aligned}$$

где $\varepsilon_{\mathbf{k}}$ – собственное значение H , а $(\cdot)_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}$ обозначает матричный элемент. Меняя индексы $\mathbf{k}$ и $\mathbf{k}'$ во второй сумме, получаем

$$\chi_{\mathbf{q}}^{-+}(t) = \frac{2i}{Z} \left(\sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} (s_{\mathbf{q}}^{-})_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} (s_{-\mathbf{q}}^{+})_{\mathbf{k}',\mathbf{k}} (e^{-\varepsilon_{\mathbf{k}}/T} - e^{-\varepsilon_{\mathbf{k}'}/T}) e^{i(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}'})t} \right) \theta(t).$$

Вычисляя фурье-образ (2), окончательно находим

$$\begin{aligned} \chi_{\mathbf{q}}^{-+}(\omega) &= \frac{2i}{Z} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} (s_{\mathbf{q}}^{-})_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} (s_{-\mathbf{q}}^{+})_{\mathbf{k}',\mathbf{k}} (e^{-\varepsilon_{\mathbf{k}}/T} - e^{-\varepsilon_{\mathbf{k}'}/T}) \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \int_0^{\infty} e^{i(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}'} + \omega + i\eta)t} dt = \\ &= -\frac{2}{Z} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} (s_{\mathbf{q}}^{-})_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} (s_{-\mathbf{q}}^{+})_{\mathbf{k}',\mathbf{k}} \frac{e^{-\varepsilon_{\mathbf{k}}/T} - e^{-\varepsilon_{\mathbf{k}'}/T}}{\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}'} + \omega + i0}. \end{aligned} \quad (9)$$

Аналогично выводим выражение для $\chi_{\mathbf{q}}^{-+}(i\omega_m)$ в энергетическом представлении. Записывая температурную функцию Грина (5) в базисе собственных векторов гамильтониана H :

$$\chi_{\mathbf{q}}^{-+}(\tau) = \frac{2}{Z} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} (s_{\mathbf{q}}^{-})_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} (s_{-\mathbf{q}}^{+})_{\mathbf{k}',\mathbf{k}} e^{-\varepsilon_{\mathbf{k}}/T} e^{(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}'})\tau},$$

и вычисляя фурье-образ (6), имеем

$$\chi_{\mathbf{q}}^{-+}(i\omega_m) = -\frac{2}{Z} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} (s_{\mathbf{q}}^{-})_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} (s_{-\mathbf{q}}^{+})_{\mathbf{k}',\mathbf{k}} \frac{e^{-\varepsilon_{\mathbf{k}}/T} - e^{-\varepsilon_{\mathbf{k}'}/T}}{\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}'} + i\omega_m}. \quad (10)$$

Выражения (9) и (10) – специальные случаи рациональной функции $\chi_{\mathbf{q}}^{-+}(z)$, которая аналитична в верхней полуплоскости $\text{Im } z > 0$. Таким образом, соотношение (9) получается из (10) при помощи аналитического продолжения

$$\chi_{\mathbf{q}}^{-+}(i\omega_m) \Big|_{i\omega_m \rightarrow \omega + i0} = \chi_{\mathbf{q}}^{-+}(\omega).$$

Вычисление восприимчивости $\chi_{\mathbf{q}}^{-+}(i\omega_m) \equiv \chi_{\mathbf{q}m}^{-+}$ в ДТСФ основано на методе функционального интегрирования (подробнее см. [6]). Модельный гамильтониан $H = H_0 + H_1$ состоит из одноэлектронной части H_0 , вычисляемой из “первых принципов”, и слагаемого H_1 , отвечающего за взаимодействие и выражающегося многозонным гамильтонианом Хаббарда. Последний может быть записан в виде $H_1 = -u \sum_j s_j^2$, где u – внутриатомная константа взаимодействия.

При помощи преобразования Стратоновича–Хаббарда [8], [9] парное взаимодействие электронов заменяется взаимодействием электронов с обменным полем

$$V = (V_1(\tau), V_2(\tau), \dots), \quad V_j(\tau) = \mathbf{V}_j(\tau) \boldsymbol{\sigma},$$

которое флуктуирует в пространстве и “времени” τ . Тогда статистическая сумма записывается в виде функционального интеграла по флуктуирующему полю:

$$Z = \left(\int e^{-F_0(V)/T} DV \right)^{-1} \int e^{-F_0(V)/T} e^{-F_1(V)/T} DV.$$

Здесь $F_0(V) = (2uN_d)^{-1} \text{Tr}(V^2)$ – энергия поля, где N_d – число вырожденных d-полос;

$$F_1(V) = T \text{Tr} \ln G(V) \quad (11)$$

– свободная энергия невзаимодействующих электронов в поле V , выраженная через функцию Грина $G(V)$, а DV указывает на функциональное интегрирование (см., например, [20]).

В рамках метода функционального интегрирования спиновый коррелятор связан с полевым коррелятором формулой [6]

$$\langle s_{\mathbf{q}m}^- s_{-\mathbf{q}-m}^+ \rangle = \frac{1}{4} \left(\frac{1}{\tilde{u}^2} \langle V_{\mathbf{q}m}^- V_{-\mathbf{q}-m}^+ \rangle - \frac{T}{\tilde{u}} \right),$$

где $V_{\mathbf{q}m}^\pm = V_{\mathbf{q}m}^x \pm iV_{\mathbf{q}m}^y$, а $\tilde{u} = u/N_a$ – нулевой коэффициент Фурье константы взаимодействия u (N_a – число атомов). В результате восприимчивость (8) принимает вид

$$\chi_{\mathbf{q}m}^{-+} = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{\tilde{u}^2 T} \langle V_{\mathbf{q}m}^- V_{-\mathbf{q}-m}^+ \rangle - \frac{1}{\tilde{u}} \right). \quad (12)$$

Дальнейшее вычисление динамической восприимчивости (12) выполняется при помощи оптимального гауссова приближения [18], [19]. А именно, функция $F(V) = F_0(V) + F_1(V)$ заменяется квадратичной формой

$$\begin{aligned} F^{(2)}(V) = \sum_{\mathbf{q},m} & \left[V_{\mathbf{q}m}^- \left(\frac{1}{2\tilde{u}} - \chi_{\mathbf{q}m}^{0+-} \right) V_{-\mathbf{q}-m}^+ + \right. \\ & \left. + V_{\mathbf{q}m}^+ \left(\frac{1}{2\tilde{u}} - \chi_{\mathbf{q}m}^{0-+} \right) V_{-\mathbf{q}-m}^- + \Delta V_{\mathbf{q}m}^z \left(\frac{1}{\tilde{u}} - \chi_{\mathbf{q}m}^{0zz} \right) \Delta V_{-\mathbf{q}-m}^z \right], \end{aligned} \quad (13)$$

где поперечная неусиленная восприимчивость $\chi_{\mathbf{q}m}^{0-+}$ дается выражением

$$\chi_{\mathbf{q}m}^{0-+} = -\frac{1}{2} \left\langle \frac{\partial^2 F_1(V)}{\partial V_{\mathbf{q}m}^+ \partial V_{-\mathbf{q}-m}^-} \right\rangle, \quad (14)$$

$\chi_{\mathbf{q}m}^{0+-} = \chi_{-\mathbf{q}-m}^{0-+}$, и $\Delta V_{\mathbf{q}m}^z = V_{\mathbf{q}m}^z - \bar{V}_z \delta_{\mathbf{q}0} \delta_{m0}$ – отклонение от среднего поля $\bar{V}_z$. Используя формулу (11) для свободной энергии $F_1(V)$, мы выражаем восприимчивость (14) через среднюю функцию Грина $\langle G(V) \rangle \equiv \bar{G}$:

$$\chi_{\mathbf{q}m}^{0-+} = -\frac{N_d}{2} T \sum_{\mathbf{k},n} \bar{G}_{\mathbf{k}\downarrow}(i\omega_n) \bar{G}_{\mathbf{k}-\mathbf{q},\uparrow}(i\omega_n - i\omega_m), \quad (15)$$

где $\omega_n = (2n + 1)\pi T$ – нечетные термодинамические “частоты”. Средняя функция Грина $\bar{G}$ вычисляется самосогласованно и учитывает температурные возбуждения с произвольными волновыми векторами и “частотами”.

Чтобы получить формулу для усиленной восприимчивости (12), нам необходимо вычислить полевой коррелятор. Квадратичная форма (13) оптимального гауссова приближения может быть записана в матричной форме:

$$F^{(2)}(V) = \sum_{\mathbf{q}, m} \Delta \mathbf{V}_{\mathbf{q}m} A_{\mathbf{q}m} \Delta \mathbf{V}_{-\mathbf{q}-m},$$

где $\Delta \mathbf{V}_{\mathbf{q}m} = (V_{\mathbf{q}m}^-, V_{\mathbf{q}m}^+, \Delta V_{\mathbf{q}m}^z)$ и

$$A_{\mathbf{q}m} = \begin{pmatrix} 0 & (2\tilde{u})^{-1} - \chi_{\mathbf{q}m}^{0+-} & 0 \\ (2\tilde{u})^{-1} - \chi_{\mathbf{q}m}^{0-+} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \tilde{u}^{-1} - \chi_{\mathbf{q}m}^{0zz} \end{pmatrix}.$$

Тогда коррелятор гауссова поля дается формулой (см., например, [21], § 111)

$$\langle \Delta V_{\mathbf{q}m}^\alpha \Delta V_{-\mathbf{q}-m}^\beta \rangle = \frac{T}{2} (A_{\mathbf{q}m}^{-1})^{\alpha\beta}, \quad \alpha, \beta = -, +, z.$$

Вычисляя обратную матрицу $A_{\mathbf{q}m}^{-1}$, получаем

$$\langle V_{\mathbf{q}m}^- V_{-\mathbf{q}-m}^+ \rangle = \frac{T}{2((2\tilde{u})^{-1} - \chi_{\mathbf{q}m}^{0-+})}.$$

Подстановка этого выражения в (12) дает

$$\chi_{\mathbf{q}m}^{-+} = \frac{\chi_{\mathbf{q}m}^{0-+}}{1 - 2\tilde{u}\chi_{\mathbf{q}m}^{0-+}}. \quad (16)$$

3. НИЗКОТЕМПЕРАТУРНЫЙ ПРЕДЕЛ

3.1. Полюсы поперечной восприимчивости. В формуле (15) для неусиленной восприимчивости $\chi_{\mathbf{q}m}^{0-+}$ средняя функция Грина записывается в виде

$$\bar{G}(z) = (z + \mu - H_0 - \Sigma(z))^{-1},$$

где $\Sigma(z)$ – собственная энергия, а μ – химический потенциал. При низких температурах флуктуационный вклад $\Delta\Sigma = \Sigma - \bar{V}$ становится малым и им можно пренебречь. Тогда

$$\bar{G}_{\mathbf{k}\sigma}(z) = (z + \mu - \varepsilon_{\mathbf{k}\sigma})^{-1},$$

где $\varepsilon_{\mathbf{k}\sigma} = \varepsilon_{\mathbf{k}} + \sigma \bar{V}_z$ ($\varepsilon_{\mathbf{k}}$ – энергетический спектр оператора H_0 , а $\sigma = \uparrow\downarrow$ или $\pm$).

Суммирование по нечетным “частотам” ω_n в выражении (15) проводится по формуле (см., например, [12])

$$T \sum_n h(i\omega_n + \mu) = \sum_l \text{Res}_{z=z_l} [h(z)] f(z_l), \quad (17)$$

где функция $h(z)$ имеет простые полюсы в точках $z = z_l$ и аналитична в остальных точках комплексной плоскости, $\text{Res}_{z=z_l} [h(z)]$ означает вычет функции $h(z)$ в точке z_l , и $f(z) = [e^{(z-\mu)/T} + 1]^{-1}$ – функция Ферми. Используем функцию $h(z)$ вида

$$h(z) = \bar{G}_{\mathbf{k}\downarrow}(z - \mu) \bar{G}_{\mathbf{k}-\mathbf{q},\uparrow}(z - \mu - i\omega_m),$$

где функция Грина $\bar{G}_{\mathbf{k}\downarrow}(z - \mu) = (z - \varepsilon_{\mathbf{k}\downarrow})^{-1}$ имеет полюс в точке $\varepsilon_{\mathbf{k}\downarrow}$, а функция Грина $\bar{G}_{\mathbf{k}-\mathbf{q},\uparrow}(z - \mu - i\omega_m) = (z - \varepsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q},\uparrow} - i\omega_m)^{-1}$ имеет полюс в точке $\varepsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q},\uparrow} + i\omega_m$. Используя формулу суммирования (17), записываем восприимчивость (15) в виде

$$\chi_{\mathbf{q}m}^{0-+} = -\frac{N_d}{2} \sum_{\mathbf{k}} \left(\frac{f(\varepsilon_{\mathbf{k}\downarrow})}{\varepsilon_{\mathbf{k}\downarrow} - \varepsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q},\uparrow} - i\omega_m} + \frac{f(\varepsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q},\uparrow} + i\omega_m)}{\varepsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q},\uparrow} + i\omega_m - \varepsilon_{\mathbf{k}\downarrow}} \right).$$

С учетом свойства функции Ферми $f(\varepsilon + i\omega_m) = f(\varepsilon)$ получаем

$$\chi_{\mathbf{q}m}^{0-+} = \frac{N_d}{2} \sum_{\mathbf{k}} \frac{f(\varepsilon_{\mathbf{k}\downarrow}) - f(\varepsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q},\uparrow})}{i\omega_m + \varepsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q},\uparrow} - \varepsilon_{\mathbf{k}\downarrow}}. \quad (18)$$

Аналитическое продолжение $i\omega_m \rightarrow \omega + i0$ выражения (18) дает неусиленную восприимчивость в приближении случайных фаз (см. формулу (4.17) в [3]), умноженную на число d-полос N_d .

Полюсы усиленной восприимчивости (16) определяют спектр спиновых волн. Действительно, условие $\chi_{\mathbf{q}}^{-+}(\varepsilon) = \infty$ равносильно $1 - 2\tilde{u}\chi_{\mathbf{q}}^{0-+}(\varepsilon) = 0$. При $\mathbf{q} = 0$ по формуле (18) находим

$$1 = \tilde{u}N_d \sum_{\mathbf{k}} \frac{f(\varepsilon_{\mathbf{k}\downarrow}) - f(\varepsilon_{\mathbf{k}\uparrow})}{\varepsilon + \varepsilon_{\mathbf{k}\uparrow} - \varepsilon_{\mathbf{k}\downarrow}} = \frac{\tilde{u}N_d}{\varepsilon + 2\bar{V}_z} \sum_{\mathbf{k}} (f(\varepsilon_{\mathbf{k}\downarrow}) - f(\varepsilon_{\mathbf{k}\uparrow})). \quad (19)$$

Сумма в правой части выражается через среднее поле $\bar{V}_z$. Действительно, среднее поле $\bar{V}_z$ и средний спиновый момент $\bar{s}_z$ связаны соотношением $\bar{V}_z = -\tilde{u}N_a\bar{s}_z$. Выражая средний спиновый момент $\bar{s}_z$ через функцию Грина [18], имеем

$$\bar{V}_z = -\tilde{u}N_dT \sum_{\mathbf{k},n} \frac{1}{2} (\bar{G}_{\mathbf{k}\uparrow}(i\omega_n) - \bar{G}_{\mathbf{k}\downarrow}(i\omega_n)).$$

Используя приближение $\Delta\Sigma = 0$ для средней функции Грина $\bar{G}$ и вычисляя сумму по n при помощи формулы (17), находим

$$2\bar{V}_z = -\tilde{u}N_d \sum_{\mathbf{k}} [f(\varepsilon_{\mathbf{k}\uparrow}) - f(\varepsilon_{\mathbf{k}\downarrow})]. \quad (20)$$

Подставляя это выражение в (19), получаем

$$1 = \frac{2\bar{V}_z}{\varepsilon + 2\bar{V}_z}.$$

Отсюда следует, что $\varepsilon = 0$ при $\mathbf{q} = 0$. Поскольку формула (18) инвариантна относительно инверсии $\mathbf{q} \rightarrow -\mathbf{q}$, при малых $\mathbf{q}$ имеем $\varepsilon_{\text{sw}}(\mathbf{q}) = Dq^2$.

Далее, получим явное выражение для обменной жесткости D и низкотемпературное асимптотическое разложение для $\chi_{\mathbf{q}}^{-+}(\varepsilon)$. Перепишем формулу (18) в виде

$$\chi_{\mathbf{q}}^{0-+}(\varepsilon) = -\frac{N_d}{4\bar{V}_z} \sum_{\mathbf{k}} \left[\left(1 + \frac{\varepsilon}{2\bar{V}_z} - \frac{\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \varepsilon_{\mathbf{k}}}{2\bar{V}_z} \right)^{-1} (f(\varepsilon_{\mathbf{k}\uparrow}) - f(\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\downarrow})) \right]. \quad (21)$$

Для малых ε и $\mathbf{q}$ таких, что $\varepsilon \ll 2\bar{V}_z$ и $|\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \varepsilon_{\mathbf{k}}| \ll 2\bar{V}_z$, представляем дробь в (21) в виде ряда геометрической прогрессии. Сохраняя вторую частичную сумму ряда, получаем

$$\begin{aligned} \chi_{\mathbf{q}}^{0-+}(\varepsilon) = & -\frac{N_d}{4\bar{V}_z} \left\{ \left(1 - \frac{\varepsilon}{2\bar{V}_z} \right) \sum_{\mathbf{k}} [f(\varepsilon_{\mathbf{k}\uparrow}) - f(\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\downarrow})] + \right. \\ & + \frac{1}{2\bar{V}_z} \sum_{\mathbf{k}} (\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \varepsilon_{\mathbf{k}}) [f(\varepsilon_{\mathbf{k}\uparrow}) - f(\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\downarrow})] + \\ & \left. + \frac{1}{(2\bar{V}_z)^2} \sum_{\mathbf{k}} (\varepsilon - (\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \varepsilon_{\mathbf{k}}))^2 [f(\varepsilon_{\mathbf{k}\uparrow}) - f(\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\downarrow})] \right\}. \quad (22) \end{aligned}$$

В первом члене разложения (22) сумма

$$\sum_{\mathbf{k}} [f(\varepsilon_{\mathbf{k}\uparrow}) - f(\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\downarrow})] = \sum_{\mathbf{k}} [f(\varepsilon_{\mathbf{k}\uparrow}) - f(\varepsilon_{\mathbf{k}\downarrow})]$$

выражается через среднее поле $\bar{V}_z$. Используя (20), получаем

$$\sum_{\mathbf{k}} [f(\varepsilon_{\mathbf{k}\uparrow}) - f(\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\downarrow})] = -\frac{2\bar{V}_z}{\tilde{u}N_d}. \quad (23)$$

Во втором члене разложения (22) преобразуем сумму к виду

$$\sum_{\mathbf{k}} (\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \varepsilon_{\mathbf{k}}) [f(\varepsilon_{\mathbf{k}\uparrow}) - f(\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\downarrow})] = \sum_{\mathbf{k}} (\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \varepsilon_{\mathbf{k}}) f(\varepsilon_{\mathbf{k}\uparrow}) + \sum_{\mathbf{k}} (\varepsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} - \varepsilon_{\mathbf{k}}) f(\varepsilon_{\mathbf{k}\downarrow}).$$

Используя разложение

$$\varepsilon_{\mathbf{k}\pm\mathbf{q}} - \varepsilon_{\mathbf{k}} = \pm\mathbf{q}\nabla\varepsilon_{\mathbf{k}} + \frac{1}{2}(\mathbf{q}\nabla)^2\varepsilon_{\mathbf{k}} + \dots \quad (24)$$

до квадратичных членов по $\mathbf{q}$, получаем

$$\begin{aligned} \sum_{\mathbf{k}} (\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \varepsilon_{\mathbf{k}}) [f(\varepsilon_{\mathbf{k}\uparrow}) - f(\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\downarrow})] = \\ = \sum_{\mathbf{k}} (\mathbf{q}\nabla\varepsilon_{\mathbf{k}}) [f(\varepsilon_{\mathbf{k}\uparrow}) - f(\varepsilon_{\mathbf{k}\downarrow})] + \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{2} ((\mathbf{q}\nabla)^2 \varepsilon_{\mathbf{k}}) [f(\varepsilon_{\mathbf{k}\uparrow}) + f(\varepsilon_{\mathbf{k}\downarrow})]. \end{aligned} \quad (25)$$

Из симметрии спинволнового спектра $\varepsilon_{\mathbf{k}} = \varepsilon_{-\mathbf{k}}$ следует $\nabla\varepsilon_{-\mathbf{k}} = -\nabla\varepsilon_{\mathbf{k}}$. Тогда первая сумма в правой части (25) обращается в нуль, и мы имеем

$$\sum_{\mathbf{k}} (\varepsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} - \varepsilon_{\mathbf{k}}) [f(\varepsilon_{\mathbf{k}\uparrow}) - f(\varepsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q},\downarrow})] = \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{2} ((\mathbf{q}\nabla)^2 \varepsilon_{\mathbf{k}}) [f(\varepsilon_{\mathbf{k}\uparrow}) + f(\varepsilon_{\mathbf{k}\downarrow})]. \quad (26)$$

Наконец, преобразуем сумму в третьем члене разложения (22). Используя разложение (24) до квадратичных членов по $\mathbf{q}$, с учетом $\varepsilon = Dq^2$ получаем

$$\sum_{\mathbf{k}} (\varepsilon - (\varepsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} - \varepsilon_{\mathbf{k}}))^2 [f(\varepsilon_{\mathbf{k}\uparrow}) - f(\varepsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q},\downarrow})] = \sum_{\mathbf{k}} (\mathbf{q}\nabla\varepsilon_{\mathbf{k}})^2 [f(\varepsilon_{\mathbf{k}\uparrow}) - f(\varepsilon_{\mathbf{k}\downarrow})]. \quad (27)$$

Подстановка (23), (26) и (27) в (22) дает

$$\begin{aligned} \chi_{\mathbf{q}}^{0-+}(\varepsilon) = \frac{1}{2} \left\{ \frac{1}{\tilde{u}} \left(1 - \frac{\varepsilon}{2\bar{V}_z} \right) - \frac{N_d}{(2\bar{V}_z)^2} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{2} ((\mathbf{q}\nabla)^2 \varepsilon_{\mathbf{k}}) [f(\varepsilon_{\mathbf{k}\uparrow}) + f(\varepsilon_{\mathbf{k}\downarrow})] - \right. \\ \left. - \frac{N_d}{(2\bar{V}_z)^3} \sum_{\mathbf{k}} (\mathbf{q}\nabla\varepsilon_{\mathbf{k}})^2 [f(\varepsilon_{\mathbf{k}\uparrow}) - f(\varepsilon_{\mathbf{k}\downarrow})] \right\}. \end{aligned}$$

Используя $\bar{V}_z = -\tilde{u}N_a\bar{s}_z$, записываем

$$1 - 2\tilde{u}\chi_{\mathbf{q}}^{0-+}(\varepsilon) = \frac{1}{2\tilde{u}N_a\bar{s}_z} (Dq^2 - \varepsilon),$$

где обменная жесткость D дается выражением³⁾

$$\begin{aligned} Dq^2 = \frac{N_d}{2N_a\bar{s}_z} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{2} ((\mathbf{q}\nabla)^2 \varepsilon_{\mathbf{k}}) [f(\varepsilon_{\mathbf{k}\uparrow}) + f(\varepsilon_{\mathbf{k}\downarrow})] - \\ - \frac{N_d}{\tilde{u}(2N_a\bar{s}_z)^2} \sum_{\mathbf{k}} (\mathbf{q}\nabla\varepsilon_{\mathbf{k}})^2 [f(\varepsilon_{\mathbf{k}\uparrow}) - f(\varepsilon_{\mathbf{k}\downarrow})]. \end{aligned}$$

Таким образом, при малых $\mathbf{q}$ и ε усиленная восприимчивость (16) имеет следующее асимптотическое разложение:

$$\chi_{\mathbf{q}}^{-+}(\varepsilon) = \frac{1}{2\tilde{u}} \left(\frac{2\tilde{u}N_a\bar{s}_z}{Dq^2 - \varepsilon} - 1 \right). \quad (28)$$

³⁾Обсуждение различных выражений для обменной жесткости D в многополосном случае см. в статье [22].

3.2. Закон $T^{3/2}$ для намагниченности. При низких температурах используем стандартное предположение о том, что магнитное поле изменяет *ориентацию* спиновых моментов, но не изменяет их величину. Тогда, пренебрегая продольной флуктуацией, записываем локальный спиновый момент в виде [6]

$$s_L = \frac{1}{u} \left(\bar{V}_z^2 + \langle \Delta V_\perp^2 \rangle' \right)^{1/2}, \quad (29)$$

где $\langle \Delta V_\perp^2 \rangle'$ – локальная поперечная флуктуация (штрих указывает на то, что мы пренебрегаем собственной флуктуацией поля). Поскольку локальный спиновый момент (29) не меняется с температурой, а величина $\langle \Delta V_\perp^2 \rangle' / \bar{V}_z^2$ мала, получаем приближенную формулу

$$\bar{V}_z(T) = \bar{V}_z(0) \left(1 - \frac{\langle \Delta V_\perp^2 \rangle'(T)}{2\bar{V}_z^2(0)} \right). \quad (30)$$

Можно показать, что флуктуация $\langle \Delta V_\perp^2 \rangle'$ записывается в виде

$$\langle \Delta V_\perp^2 \rangle' = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{q}, m} (\langle V_{\mathbf{q}m}^+ V_{-\mathbf{q}-m}^- \rangle' + \langle V_{\mathbf{q}m}^- V_{-\mathbf{q}-m}^+ \rangle'). \quad (31)$$

Используя формулу (12), имеем

$$\langle V_{\mathbf{q}m}^- V_{-\mathbf{q}-m}^+ \rangle' = 2\tilde{u}^2 T \chi_{\mathbf{q}}^{-+}(i\omega_m).$$

Аналогичное выражение имеет место для коррелятора $\langle V_{\mathbf{q}m}^+ V_{-\mathbf{q}-m}^- \rangle'$. Тогда, заменяя сумму по четным “частотам” ω_m в (31) интегралом с функцией Бозе $B(\varepsilon) = (e^{\varepsilon/T} - 1)^{-1}$ (подробнее см. [19]), получаем

$$\langle \Delta V_\perp^2 \rangle' = \tilde{u}^2 \sum_{\mathbf{q}} \frac{1}{\pi} \int B(\varepsilon) \operatorname{Im}(\chi_{\mathbf{q}}^{+-}(\varepsilon) + \chi_{\mathbf{q}}^{-+}(\varepsilon)) d\varepsilon.$$

Соотношение $\operatorname{Im} \chi_{\mathbf{q}}^{+-}(\varepsilon) = -\operatorname{Im} \chi_{\mathbf{q}}^{-+}(-\varepsilon)$ позволяет выразить правую часть только через восприимчивость χ^{-+} :

$$\langle \Delta V_\perp^2 \rangle' = \tilde{u}^2 \sum_{\mathbf{q}} \frac{1}{\pi} \left(- \int B(-\varepsilon) \operatorname{Im} \chi_{\mathbf{q}}^{-+}(\varepsilon) d\varepsilon + \int B(\varepsilon) \operatorname{Im} \chi_{\mathbf{q}}^{-+}(\varepsilon) d\varepsilon \right). \quad (32)$$

Теперь используем длинноволновое приближение, т. е. предполагаем, что основной вклад в сумму по зоне Бриллюэна дают члены с малыми $\mathbf{q}$. Тогда по формуле (28) имеем $\chi_{\mathbf{q}}^{-+}(\varepsilon) = \chi_{\mathbf{q}}^{-+}(\varepsilon)$. Используя это свойство в (32) вместе с тождеством $B(\varepsilon) - B(-\varepsilon) = 2B(\varepsilon) + 1$, получаем

$$\langle \Delta V_\perp^2 \rangle' = \tilde{u}^2 \sum_{\mathbf{q}} \frac{1}{\pi} \int (2B(\varepsilon) + 1) \operatorname{Im} \chi_{\mathbf{q}}^{-+}(\varepsilon) d\varepsilon.$$

Член, не зависящий от температуры, отвечает флуктуациям при $T = 0$, которые учтены в плотности электронных состояний и константе взаимодействия. Сохраняя только тепловые флуктуации и используя асимптотическое выражение (28), находим

$$\langle \Delta V_{\perp}^2 \rangle' = -2u^2 \bar{s}_z \frac{1}{N_a} \sum_{\mathbf{q}} \frac{1}{\pi} \operatorname{Im} \int \frac{B(\varepsilon)}{\varepsilon - Dq^2 + i0} d\varepsilon.$$

Вычисляя интеграл по формуле Сохоцкого, получаем

$$\langle \Delta V_{\perp}^2 \rangle' = 2u^2 \bar{s}_z \frac{1}{N_a} \sum_{\mathbf{q}} B(Dq^2).$$

Наконец, заменяем сумму по волновым векторам интегралом по зоне Бриллюэна, которая приближается для простоты сферой равного объема. Тогда флуктуации принимают вид

$$\langle \Delta V_{\perp}^2 \rangle' = 2u^2 \bar{s}_z \frac{4\pi}{\Omega_{\text{BZ}}} \int_0^{q_{\text{B}}} \frac{1}{e^{Dq^2/T} - 1} q^2 dq,$$

где Ω_{BZ} – объем зоны Бриллюэна, а q_{B} – радиус сферы. Переходя к переменной $x = (D/T)^{1/2} q$ и устремляя верхний предел интегрирования к бесконечности (при низких температурах), получаем

$$\langle \Delta V_{\perp}^2 \rangle' = \frac{2u^2 \bar{s}_z}{\Omega_{\text{BZ}}} \zeta\left(\frac{3}{2}\right) \left(\frac{\pi}{D}\right)^{3/2} T^{3/2}, \quad (33)$$

где $\zeta(3/2) \approx 2.612$ – значение дзета-функции Римана.

Подставляя выражение (33) в формулу (30) и используя $\bar{V}_z^2(0) = u^2 \bar{s}_z^2(0)$ и $\Omega_{\text{BZ}} = (2\pi)^3/\Omega_{\text{WS}}$, где Ω_{WS} – объем ячейки Вигнера–Зейтца, получаем закон $T^{3/2}$ для намагниченности $m_z(T) = g\mu_{\text{B}} \bar{s}_z(T)$:

$$\frac{m_z(T)}{m_z(0)} = 1 - a_{3/2} T^{3/2}, \quad (34)$$

где коэффициент имеет вид

$$a_{3/2} = \frac{g\mu_{\text{B}}\Omega_{\text{WS}}}{m_z(0)} \zeta\left(\frac{3}{2}\right) (4\pi D)^{-3/2}. \quad (35)$$

4. ЧИСЛЕННЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ

Полученный низкотемпературный предел ДТСФ иллюстрируем на примере железа. Постоянная решетки ОЦК-железа при $T = 20 \text{ К}$ равна $a = 2.866 \text{ \AA}$ [23]. Следовательно, для объема ячейки Вигнера–Зейтца имеем $\Omega_{\text{WS}} = a^3/2 = 11.78 \text{ \AA}^3$. Намагниченность железа при $T = 0$ равна $m(0) = 2.217 \mu_{\text{B}}$ [17], обменная жесткость равна $D_0 = 311 \text{ мЭВ \AA}^2 = 3609 \text{ К \AA}^2$ [24] и $g = 2$. Подставляя эти значения в выражение (35), находим $a_{3/2} = 2.87 \cdot 10^{-6} \text{ К}^{-3/2}$.

Рис. 1. Намагниченность железа, вычисленная в приближении спиновых волн (пунктирная линия), теории среднего поля Стонера (сплошная линия), статическом локальном (штрихпунктирная линия) и динамическом нелокальном (штриховая линия) приближениях ТСФ. Квадратами изображены экспериментальные значения [17].

Численные результаты в приближении спиновых волн для намагниченности (34) представлены на рис. 1. Для сравнения на рис. 1 приведена низкотемпературная намагниченность $m(T)$, рассчитанная в теории среднего поля Стонера и в двух приближениях ТСФ: статическом локальном и динамическом нелокальном. Приближение теории среднего поля Стонера и приближения ТСФ вычисляются в рамках ДТСФ и различаются лишь выражениями для флуктуаций $\langle \Delta V_\alpha^2 \rangle'$, $\alpha = x, z$ (см., например, [25]). Температура на рис. 1 дана в единицах температуры Кюри $T_C^{\text{exp}} = 1044 \text{ K}$ [17]. Исходными данными расчета являются значение магнитного момента $m(0)$ и полученная из “первых принципов” плотность электронных состояний $\nu(\varepsilon)$ при $T = 0$ (рис. 2). Плотность электронных состояний d-полосы немагнитного железа вычислена методом Корринги–Кона–Ростокера с самосогласованным потенциалом, взятым из [26]. Далее она сглаживается по формуле

$$\nu_d(\varepsilon) = \frac{1}{\pi} \text{Im} \int \frac{\nu(\varepsilon')}{\varepsilon - \varepsilon' - i\delta} d\varepsilon' \quad (36)$$

с параметром $\delta = 0.001$ для того, чтобы учесть затухание одноэлектронных состояний (см., например, [25]).

Как видно из рис. 1, убывание $m(T)$ в приближении теории среднего поля Стонера пренебрежимо мало. В статистическом локальном приближении ТСФ намагничен-

$\nu(\varepsilon)$ [состояния/ W /атом]

Рис. 2. Плотность электронных состояний d-полосы немагнитного железа, вычисленная методом Корринги–Кона–Ростокера с самосогласованным потенциалом (сплошная линия) и сглаженная по формуле (36) с $\delta = 0.001$ (штриховая линия). Энергия ε и параметр δ приведены в единицах ширины полосы $W = 7.16$ эВ. Вертикальная линия указывает положение уровня Ферми ε_F .

ность убывает слишком быстро ($\propto T$). Лишь в динамическом нелокальном приближении ТСФ получается хорошее согласие с экспериментальными данными. Что касается приближения спиновых волн, то оно дает лучшее согласие с экспериментом по сравнению с динамическим нелокальным приближением ТСФ на интервале от нуля до $0.2T_C^{\text{exp}} \approx 200$ К. Однако с ростом температуры приближения спиновых волн становится недостаточно. Действительно, динамическое нелокальное приближение ТСФ дает лучшее согласие при конечных температурах, включая комнатные. Отметим, что кривая для этого приближения, которая имеет асимптотику $\sim T^2$, должна идти выше, чем кривая, полученная в приближении спиновых волн, которая имеет асимптотику $\sim T^{3/2}$. Однако на рисунке этот температурный интервал настолько мал, что кривые, полученные в динамическом нелокальном приближении ТСФ и в приближении спиновых волн, там сливаются.

На рис. 3 изображено относительное изменение намагниченности $1 - m(T)/m(0)$ как функция температуры T в логарифмической шкале. Как видно, при низких температурах прямая с коэффициентом наклона $3/2$ (пунктирная линия) дает наилучшее согласие с экспериментом. Этот вывод подтверждается измерениями [17], [27], [28]. Рис. 3 также показывает, что в большом интервале высоких температур

Рис. 3. Экспериментальные данные [17] для $1 - m(T)/m(0)$ железа в логарифмической шкале на интервале $0 < T < T_C^{\text{exp}}$ (квадраты), интерполированные прямыми с коэффициентами наклона 2 (сплошная линия) и $3/2$ (пунктирная линия). На врезках изображены экспериментальные данные [17] для $m(T)/m(0)$ в единицах T^2 (вверху) и $T^{3/2}$ (внизу) на интервале $0 < T < 0.45T_C^{\text{exp}}$.

прямая с коэффициентом наклона 2 (сплошная линия) дает лучшее согласие с экспериментальными данными. Точка перехода от зависимости $T^{3/2}$ к зависимости T^2 однозначно не определена. Как видно из врезок на рис. 3, обе зависимости $T^{3/2}$ и T^2 дают практически линейную интерполяцию данных на температурном интервале $0 < T < 0.45T_C^{\text{exp}}$. Закон $T^{3/2}$ имеет асимптотический характер и выполняется по крайней мере до температуры 32 К [27], которая эквивалента 0.03 в приведенных температурах T/T_C^{exp} .

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Выведено асимптотическое разложение поперечной восприимчивости при низких температурах. Показано, что спинволновые полюсы поперечной динамической восприимчивости дают закон $T^{3/2}$ для намагниченности. Явное выражение для коэффициента в законе $T^{3/2}$ получено на основе многополосного гамильтониана Хаббарда и реальной зонной структуры.

Низкотемпературный предел ДТСФ проиллюстрирован на примере железа. Температурная зависимость намагниченности железа вычислена в приближении спиновых волн, теории среднего поля Стонера и двух приближениях ТСФ: статическом и динамическом. Расчеты показывают, что приближение спиновых волн дает хорошее

согласие с экспериментом на температурном интервале от нуля до примерно $0.2 T_C^{\text{exp}}$. При более высоких температурах, включая комнатные, динамическое приближение приводит к лучшему согласию с экспериментом вследствие флуктуационных добавок, отличных от спинволнового вклада $T^{3/2}$.

Благодарности. Работа выполнена в рамках программы Президиума РАН (проект № 12-П-2-1041) и поддержана РФФИ (грант № 11-01-00795) и Министерством образования и науки РФ (программа № 1.1016.2011).

Список литературы

- [1] D. J. Kim, *New Perspectives in Magnetism of Metals*, Kluwer, New York, 1999.
- [2] Р. Уайт, *Квантовая теория магнетизма*, Мир, М., 1985.
- [3] Т. Izuyama, D. J. Kim, R. Kubo, *J. Phys. Soc. Japan*, **18**:7 (1963), 1025–1042.
- [4] J. Hubbard, *Phys. Rev. B*, **19**:5 (1979), 2626–2636; *Phys. Rev. B*, **20**:11 (1979), 4584–4595.
- [5] Н. Hasegawa, *J. Phys. Soc. Japan*, **49**:1 (1980), 178–188; *J. Phys. Soc. Japan*, **49**:3 (1980), 963–971.
- [6] N. B. Melnikov, B. I. Reser, V. I. Grebennikov, *J. Phys.: Condens. Matter*, **23**:27 (2011), 276003, 11 pp.
- [7] A. I. Lichtenstein, M. I. Katsnelson, G. Kotliar, *Phys. Rev. Lett.*, **87**:6 (2001), 067205, 4 pp.
- [8] Р. Л. Стратонович, *Докл. АН СССР*, **115**:6 (1957), 1097–1100.
- [9] J. Hubbard, *Phys. Rev. Lett.*, **3**:2 (1959), 77–78.
- [10] B. I. Reser, N. B. Melnikov, *J. Phys.: Condens. Matter*, **20**:28 (2008), 285205, 10 pp.
- [11] А. А. Абрикосов, Л. П. Горьков, И. Е. Дзялошинский, *Методы квантовой теории поля в статистической физике*, Физматгиз, М., 1962.
- [12] Н. Bruus, K. Flensberg, *Many-Body Quantum Theory in Condensed Matter Physics*, OUP, Oxford, 2004.
- [13] F. Bloch, *Z. Phys.*, **61**:3–4 (1930), 206–219.
- [14] Т. Moriya, A. Kawabata, *J. Phys. Soc. Japan*, **35**:3 (1973), 669–676.
- [15] И. Е. Дзялошинский, П. С. Кондратенко, *ЖЭТФ*, **70**:5 (1976), 1987–2005.
- [16] F. J. Dyson, *Phys. Rev.*, **102**:5 (1956), 1217–1230; 1230–1244.
- [17] J. Crangle, G. M. Goodman, *Proc. Roy. Soc. London Ser. A*, **321**:1547 (1971), 477–491.
- [18] N. B. Melnikov, B. I. Reser, V. I. Grebennikov, *J. Phys. A: Math. Theor.*, **43**:19 (2010), 195004, 19 pp.
- [19] Н. Б. Мельников, Б. И. Резер, *Тр. МИАН*, **271** (2010), 159–180.
- [20] Ж. Зинн-Жюстен, *Континуальный интеграл в квантовой механике*, Физматлит, М., 2006.
- [21] Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Теоретическая физика*, т. V: *Статистическая физика. Часть 1*, Наука, М., 1976.
- [22] D. M. Edwards, R. B. Muniz, *J. Phys. F: Met. Phys.*, **15**:11 (1985), 2339–2356.
- [23] J. Donohue, *The Structure of the Elements*, John Wiley & Sons, New York, 1974.
- [24] A. T. Aldred, P. H. Froehle, *Internat. J. Magn.*, **2** (1972), 195–203.
- [25] B. I. Reser, *J. Phys.: Condens. Matter*, **11**:25 (1999), 4871–4885.
- [26] V. L. Moruzzi, J. F. Janak, A. R. Williams, *Calculated Electronic Properties of Metals*, Pergamon, New York, 1978.
- [27] P. C. Riedi, *Phys. Rev. B*, **8**:11 (1973), 5243–5246.
- [28] R. Pauthenet, *J. Appl. Phys.*, **53**:11 (1982), 8187–8192.